



ИХР РАН



**ХII ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
«ПРОБЛЕМЫ СОЛЬВАТАЦИИ И
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В РАСТВОРАХ.
ОТ ЭФФЕКТОВ В РАСТВОРАХ
К НОВЫМ МАТЕРИАЛАМ»**

**ШКОЛА - КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
«РАСТВОРИТЕЛЬ КАК СРЕДСТВО УПРАВЛЕНИЯ
ХИМИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ»**

**ВТОРОЙ СИМПОЗИУМ
ПО КООРДИНАЦИОННОЙ И МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОЙ
ХИМИИ «МЕЖДУНАРОДНОЙ ЛАБОРАТОРИИ ПО
МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ»**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**29 июня – 3 июля 2015 г.
Иваново, Россия**

Федеральное агентство научных организаций
Российская академия наук
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Ивановский государственный химико-технологический университет
Российский фонд фундаментальных исследований
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева



**ХII Всероссийская конференция с международным участием
«Проблемы сольватации и комплексообразования в растворах.
От эффектов в растворах к новым материалам»**

**Школа - конференция молодых ученых
«Растворитель как средство управления химическими
процессами»**

**Второй симпозиум
по координационной и металлоорганической химии
«Международной лаборатории по металлоорганической химии»**

29 июня - 03 июля 2015 г.
г. Иваново, Россия

Конференция и школа проводятся при участии и поддержке:



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО
НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ**

Федеральное агентство научных организаций



Российская академия наук

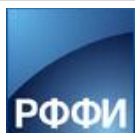


ИХР РАН

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН



**Ивановский государственный химико-технологический
университет**



**Российский фонд фундаментальных исследований
(Гранты № 15-03-20222 и № 15-33-10175)**



Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева



Компания «СервисЛаб»

**Второй симпозиум по координационной и металлоорганической химии
проводится при поддержке:**



**Российский
научный
фонд**

Российский научный фонд

Оргкомитет конференции

Председатель:

д.х.н., проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)

Сопредседатель:

д.х.н., проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)

Ученый секретарь:

к.х.н. Шмуклер Л.Э. (ИХР РАН, Иваново)

д.х.н., проф. Абросимов В.К. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н., проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н., проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)
д.х.н., проф. Галяметдинов Ю.Г. (КГТУ, Казань)
д.х.н., проф. Горбунова Ю.Г. (ИОНХ РАН, Москва)
д.х.н., проф. Дуров В.А. (МГУ, Москва)
д.х.н., проф. Ильин К.К. (СГУ, Саратов)
проф. Кесслер В.Г. (Швеция)
д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)
чл.-корр. РАН Койфман О.И. (ИГХТУ, Иваново)
д.х.н., проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)
акад. РАН Коновалов А.И. (ИОФХ Каз.НЦ РАН, Казань)
чл.-корр. РАН Кукушкин В.Ю. (СПбГУ, С.-Петербург)
д.х.н. Лебедева Н.Ш. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н., проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н., проф. Лященко А.К. (ИОНХ РАН, Москва)
д.х.н., проф. Мамардашвили Н.Ж. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н., проф. Новоселов Н.П. (СПГУТД, С.-Петербург)
д.х.н., проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н., проф. Родникова М.Н. (ИОНХ РАН, Москва)
д.х.н., проф. Сафонова Л.П. (ИХР РАН, Иваново)
чл.-корр. РАН Смирнова Н.А. (СПбГУ, С.-Петербург)
д.х.н., проф. Соловьев С.Н. (РХТУ, Москва)
д.х.н., проф. Сырбу С.А. (ИГХТУ, Иваново)
акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХ РАН, Москва)
д.х.н., проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)

Локальный оргкомитет:

Иванов К.В. (ИХР РАН, Иваново)
Ефремова Л.С. (ИХР РАН, Иваново)
Кудрякова Н.О. (ИХР РАН, Иваново)
Куликова Л.Б. (ИХР РАН, Иваново)
Макаров Д.М. (ИХР РАН, Иваново)
Потемкина О.И. (ИХР РАН, Иваново)
Пуховский Ю.П. (ИХР РАН, Иваново)
Рамазанова А.Г. (ИХР РАН, Иваново)
Рябова В.В. (ИХР РАН, Иваново)
Фадеева Ю.А. (ИХР РАН, Иваново)

Оргкомитет Школы-конференции молодых ученых

Председатель:

д.х.н., проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)

Ученый секретарь:

к.т.н. Кудрякова Н.О. (ИХР РАН, Иваново)

д.х.н., проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)

д.х.н., проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)

д.х.н., проф. Горбунова Ю.Г. (ИОНХ РАН, Москва)

д.х.н., проф. Дуров В.А. (МГУ, Москва)

д.х.н., проф. Ильин К.К. (СГУ, Саратов)

д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)

чл.-корр. РАН Койфман О.И. (ИГХТУ, Иваново)

д.х.н., проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)

д.х.н., проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)

д.х.н., проф. Новоселов Н.П. (СПГУТД, С.-Петербург)

д.х.н., проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)

д.х.н., проф. Родникова М.Н. (ИОНХ РАН, Москва)

д.х.н., проф. Сафонова Л.П. (ИХР РАН, Иваново)

д.х.н., проф. Соловьев С.Н. (РХТУ, Москва)

д.х.н., проф. Сырбу С.А. (ИГХТУ, Иваново)

д.х.н., проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)

Локальный оргкомитет:

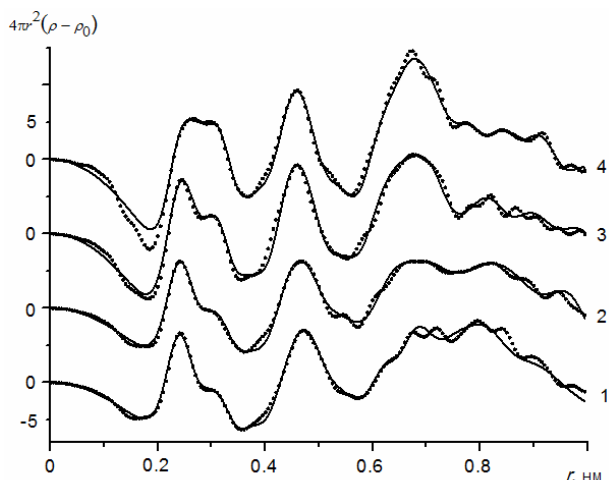
Дудина Н.А. (ИХР РАН, Иваново)

Иванов К.В. (ИХР РАН, Иваново)

Макаров Д.М. (ИХР РАН, Иваново)

Суров А.О. (ИХР РАН, Иваново)

вторую координационную сферу, включающую 14 молекул воды, находящихся на расстоянии 0.445 нм. Сформирован ионный ассоциат неконтактного типа, в котором ион Cl^- входит во вторую сферу катиона. Повышение концентрации раствора от 0.68 до 3.07 моль/л ведет к уменьшению количества молекул воды в первой координационной сфере иона Dy^{3+} от 8.5 до 6.0. Координационную сферу при этом покидают



молекулы растворителя, находившиеся на более дальнем расстоянии. Расстояния $\text{Dy}^{3+}-\text{OH}_2$ до шести молекул воды в первой координационной сфере катиона не изменяется. Количество молекул H_2O во второй координационной сфере катиона уменьшается от 14 до 4.2. При этом в растворе усиливается ионная ассоциация, проявляющаяся в том, что во вторую сферу иона диспрозия входит второй ион хлора. Анион при концентрировании практически теряет свою гидратную оболочку.

Рис. Экспериментальные ФРП (точки) водных растворов хлорида диспрозия мольных соотношений 1:16 (насыщенный) (1), 1:20 (2), 1:40 (3), 1:80 (4) и теоретические функции (сплошные линии), рассчитанные для оптимальных моделей.

ВЛИЯНИЕ СОЛЬВАТАЦИИ НА КОНФОРМАЦИОННОЕ РАВНОВЕСИЕ МОЛЕКУЛ ИБУПРОФЕНА В ХЛОРОФОРМЕ

Ходов И.А.^{1,2}, Ефимов С.В.^{1,2}, Ивлев Д.В.¹, Никифоров М.Ю.¹, Клочков В.В.², Альпер Г.А.¹, Киселев М.Г.¹

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

iakh@isc-ras.ru

Определение конформационного распределения малых биологически активных молекул в растворах является одной из важнейших задач современной физической химии. Распределение конформаций связано с полиморфизмом и биодоступностью лекарственных соединений, чем определяется актуальность исследований в этом направлении. Решающую роль в данном вопросе играют сольватационные эффекты.

В настоящей работе представлены результаты определения конформационного многообразия ибупрофена в хлороформе на основе совместного анализа данных двумерной ЯМР спектроскопии (2D NOESY и QUIET-NOESY) [1] и результатов МД моделирования. Были выявлены (как в эксперименте, так и в МД моделировании) закономерности инверсии конформационного состояния ибупрофена (уменьшение веса одной конформации и одновременного увеличения другой) при увеличении его концентрации. Похожие закономерности наблюдались ранее для фелодипина в ДМСО [2].

Данная инверсия обусловлена, как мы предполагаем, усилением межмолекулярного взаимодействия между молекулами ибупрофена. Были определены параметры состояния сверхкритического диоксида углерода, при которых наблюдается инверсия. Вместе с тем, в хлороформе это явление происходит при нормальных условиях, что связано с наличием сильного взаимодействия хлороформ-ибупрофен.

В докладе обсуждается изменение структуры димеров ибупрофена в зависимости от природы растворителя и концентрации растворенного соединения. Интересно отметить, что при кристаллизации из раствора хлороформа, структура димеров ибупрофена меняется от S- в U-образную.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также при поддержке международного гранта Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme PIRSES-GA-2009-247500. ЯМР исследования выполнены на оборудовании центра коллективного пользования "Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований".

1. I.A. Khodov, M.Yu. Nikiforov, G.A. Alper, D.S. Blokhin, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, N. Georgi. *J. Mol. Struc.*, 2013, **1035**, 358–362.
2. I.A. Khodov, S.V. Efimov, G.A. Alper, V.V. Klochkov, *J. Pharm. Scienc.*, 2014, **103**, 392–394.